学校编码：10384　　　　分类号 ______ 密级 ______
学号：X2007170009　　　　UDC______

厦门大学

硕　士　学　位　论　文

精化双正交 Lanczos 方法

The Refined Biorthogonalization Lanczos Method

王　耀　卫

指导教师姓名:　陈 桂 芝 教授
专 业 名 称:　计　算　数　学

论文提交日期:　2010 年 5 月
论文答辩日期:　2010 年　月
学位授予日期:　2010 年　月

答辩委员会主席: ____________
评　　阅　　人: ____________

2010 **年** 5 **月**

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下，独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果，均在文中以适当方式明确标明，并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范（试行）》。

另外，该学位论文为（　　　　　　　　　　　　）课题（组）的研究成果，获得（　　　　　　）课题（组）经费或实验室的资助，在（　　　　　　）实验室完成。（请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称，未有此项声明内容的，可以不作特别声明。）

声明人（签名）：

年　　月　　日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

（　　）1. 经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，于　　年　　月　　日解密，解密后适用上述授权。

（　　）2. 不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打"√"或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年　　月　　日

目 录

Contents

摘　要

根据精化投影方法的思想对经典的双正交 Lanczos 方法进行改进，提出了精化双正交 Lanczos 方法，即把非对称矩阵 A 的投影矩阵 T_m 构造成另一个三对角矩阵 $\widehat{T}_m$ ，理论上 $\widehat{T}_m$ 与 T_m 具有相同的特征值，而且 $\widehat{T}_m^T = \widehat{T}_m$ ，并用矩阵 $\widehat{T}_m$ 的特征值作为 A 的特征值的近似，进一步用 A 的左、右精化向量分别近似矩阵 A 的左、右特征向量。在计算过程中，$\widehat{T}_m$ 的特征值很容易得到，而且由它可计算高精度近似特征值。理论表明这种方法在计算大规模非对称特征问题方面比双正交 Lanczos 方法更为优越。

关键词： 双正交 Lanczos 过程， Ritz 值， Ritz 向量， 精化向量， 精化双正交 Lanczos 算法.

Abstract

We propose the refined biorthogonalization Lanczos method for modifying the classical biorthogonalization Lanczos method according to the refined projected method.First,we transform the projected matrix T_m of unsymmetric matrix A to obtain another tridiagonal matrix $\widehat{T}_m$ with the same eigenvalues,and the eigenvalues of matrix $\widehat{T}_m$,$\widehat{T}_m$ and T_m have the same eigenvalues,but $\widehat{T}_m$ satisfies $\widehat{T}_m^T = \widehat{T}_m$.And we use the eigenvalues of matrix $\widehat{T}_m$ as the approximate eigenvalues of matrix A. At the same time,the left and right refined vectors of matrix A are used as the approximate left and right eigenvectors of matrix A respectively.The eigenvalues of matrix $\widehat{T}_m$ are easily computed,and it can be used to compute high precision approximate eigenvalues. The theory shows that the method is superior to the biorthogonalization Lanczos method in computing large unsymmetric eigenproblems.

Key words: biorthogonalization Lanczos process, Ritz values , Ritz vectors, refined biorthogonalization Lanczos algorithm.

第一章 引 言

§1.1 研究背景

很多实际问题可归结为非对称矩阵的特征问题，如有阻尼的振动问题、化学反应问题、宏观经济平衡问题等，它们最后都可归纳为矩阵的特征问题

$$A\varphi_i = \lambda_i \varphi_i \tag{1.1}$$

的求解，其中 A 为 n 阶实（或复）矩阵， $(\lambda_i,\varphi_i), i = 1, 2, \cdots, n$ 为 A 的特征对 $(\|\varphi_i\| = 1)$ 。因此，研究如何求解矩阵的特征问题，给出有效和可靠的计算方法将是非常重要，并有着实际意义的。

为了求出高精度的特征对, 需要设计出好的算法。一个好的算法要求数值稳定、存储量小、运算量少, 而且要易于计算机实现。当 A 是对称矩阵时, 常选择的方法之一就是不必再正交的 Lanczos 算法 [4] ，用它计算近似特征值只需存储两个向量, 其特征向量能由它产生的 Lanczos 向量得到, 而且这种方法简单易用。当 A 是非对称矩阵时，常选择的特征问题解法都是基于 Arnoldi 算法或非对称 Lanczos 算法。Arnoldi 算法是一种正交化的 Krylov 子空间投影方法 [9] , 简单易用, 但存储量大; 隐式重新开始的 Arnoldi(IRA) 方法 [21] ，从某种程度上只是缓解了存储量大的问题。 ARPACK[21] 工具软件健壮而且稳定，但若矩阵 A 规模大，它就需要占用很大的内存，特别是如果遇到矩阵分解，内存的问题会更突出。非对称 Lanczos 算法 (ULA) 是一种斜投影方法 [9] , 虽然只需要存储四个向量, 但最大的缺陷是用矩阵的初始形式计算出的特征值精度不够高。为解决这一问题而提出的双正交 Lanczos 算法，它用了两组正交向量。从理论上来说, 为了得到高精度的特征值最简单的方式就是重新双正交化这两个 Lanczos 向量。然而, 在得到高精度特征值的同时, 双正交性也会失去 [1] 。此外，进行重新双正交化会大大增加 CPU 的消耗而且会破坏 ULA 占内存小的优点。 Day[7] 提出了一种半正交化方法，证明了：在有限精度下，用这种方法可以计算出高精度的特征值。但在每次重新正交化过程中，所有的 Lanczos

向量必须或者存储在内存中或者要从硬盘里读取，这会大大增加内存消耗或增加计算量。后来 Cullum 和 Willoughby[5] 将不必再正交的对称 Lanczos 算法推广至非对称情况，并提出一种新的处理方式，其基本思想是导出的三对角矩阵 $\widehat{T}_m$ ，满足 $\widehat{T}_m^T = \widehat{T}_m$ 。利用这种思想可以很容易地计算出高精度的特征值，而且占内存很低，但 $\widehat{T}_m$ 可能会是一个复矩阵，需要进行复运算，这样会使用复 Lanczos 向量，从而增加内存量和 CPU 消耗。

精化投影类算法 [12] 是目前求解矩阵特征问题数值更稳定，求出近似特征对的精度更高的一种数值方法，其基本思想为：对每一个近似特征值 $\widetilde{\lambda}_i$, 在子空间 E 中寻找满足

$$\|(A-\widetilde{\lambda}_i I)\widetilde{u}_i\| = \min_{u\in E,\|u\|=1} \|(A-\widetilde{\lambda}_i I)u\| \tag{1.2}$$

的 $\widetilde{u}_i(\|\widetilde{u}_i\|=1)$, 并用 $(\widetilde{\lambda}_i,\widetilde{u}_i)$ 作为 A 的特征对 (λ_i,φ_i) 的近似, 称 $\widetilde{u}_i$ 为 A 在子空间 E 上与 $\widetilde{\lambda}_i$ 相对应的精化向量。对指定的求解子空间 E ，精化向量 $\widetilde{u}_i$ 可通过计算一个小规模矩阵的特征问题或小规模矩阵的奇异值分解 (SVD) 来计算。理论和实际计算均表明精化投影方法可以得到较精确的特征对, 其存储量小, 占用内存很低。从而说明在计算非对称矩阵特征对方面，精化投影方法比经典的投影方法更为优越。

§1.2 本文主要工作

本文利用精化投影方法对经典的双正交 Lanczos 方法进行了改进，提出了精化双正交 Lanczos 方法，即利用 Cullum 和 Willoughby 的思想把非对称矩阵 A 的投影矩阵 T_m 构造成三对角矩阵 $\widehat{T}_m$ ，该矩阵满足 $\widehat{T}_m^T = \widehat{T}_m$ ，并用矩阵 $\widehat{T}_m$ 的特征值作为 A 的特征值的近似，进一步用 A 的左、右精化向量分别近似矩阵 A 的左、右特征向量。精化向量可以通过求解一个小规模矩阵的特征问题或通过做小规模奇异值分解 (SVD) 得到。 T_m 是一个非对称三对角矩阵，若直接计算它的特征值则得到的近似特征值精度不高。此处，我们构造的三对角矩阵 $\widehat{T}_m$ ， 一方面 $\widehat{T}_m$ 与 T_m 具有相同的特征值，另一方面 $\widehat{T}_m$ 满足 $\widehat{T}_m^T = \widehat{T}_m$ ，理论表明用它的特征值作为 A 相

应特征值的近似效果更好，而且用精化向量作为矩阵 A 的近似特征向量，在运算量以及内存消耗方面具有很大的优势。

本文共分五部分，第一章简要介绍计算大规模非对称矩阵特征问题的一些方法和本文的主要工作；第二章介绍双正交 Lanczos 方法及其算法；第三章给出精化双正交 Lanczos 方法以及算法；第四章给出半精化双正交 Lanczos 方法和算法，并给出了半精化近似特征对和精化近似特征对对应的残量之间的关系；第五章给出本文的结论。

本文中 A 表示 n 阶非对称实（或复）矩阵；若不做任何标记，所有范数均为 2−范数；上标“ * ”表示共轭转置，上标“—”表示复数的共轭复数，I 表示 n 阶单位矩阵，I_m 表示 m 阶单位阵，e_m 表示 I_m 的第 m 列；$Real$ 和 $Imag$ 分别表示复向量（或复数）的实部和虚部；$K_m(A, v_1)$ 表示由向量组 $v_1, Av_1, \cdots, A^{m-1}v_1$ 张成的 m 维 Krylov 子空间。

第二章 双正交 Lanczos 方法

§2.1 双正交 Lanczos 方法

双正交 Lanczos 方法是由 Lanczos 于 1950 年提出的，该方法属于斜投影方法，其基本思路是首先利用两组双正交向量将矩阵 A 逐次三对角化，得到一小规模矩阵 T_m ，而后计算 T_m 的特征值和相应的左、右特征向量，并将它们作为矩阵 A 的左、右特征对的近似。

该方法的缺陷是在有限精度下双正交性会很快失去。直到 1971 年，Paige[17] 在他的博士论文中，在矩阵 A 为对称阵并在有限精度条件下，对 Lanczos 算法进行了彻底的分析，结果表明正交性的损失并不一定是坏事，相反，正交性的损失必然伴随着至少一个 $Ritz$ 值收敛于矩阵 A 的特征值，反之亦然。然而，当矩阵 A 非对称时，在三对角过程的每一步，都可能会发生严重中断 [2]，并且严重中断的出现与舍入误差、问题的病态程度均无关。此时，问题变得非常复杂和困难。关于如何处理和避免严重中断，目前已有了几个健壮的策略，Taylor 和 Parlett[18] 提出了 Lanczos 算法的 ”Look-ahead” 版本，它利用 2×2 选主元来改进 Lanczos 算法。后来 Cullum[6] 将不带再正交化的对称 Lanczos 算法推广至非对称情况并提出一种新的处理导出的三对角矩阵的方法。同时， Freund[8],Gutknecht[10],Parlett[19],Saad[20] 和 Brezinski[2, 3] 等人从不同的角度研究了此方法。Bai[1] 的分析表明：在有限精度下，如果 $Ritz$ 值的条件数合理并且没有严重中断发生，则 Ritz 值的收敛即意味着双正交性的失去。而且对于经典的投影方法，理论分析表明：它存在着 $Ritz$ 值收敛时， $Ritz$ 向量可能不收敛的隐患 [11] 。下面具体介绍双正交 Lanczos 方法：

给定两个 m 维子空间 L 和 K, 斜投影方法用满足

$$\begin{cases} \widetilde{\varphi}_i \in K, \\ A\widetilde{\varphi}_i - \widetilde{\lambda}_i\widetilde{\varphi}_i \perp L \end{cases}$$

的 $(\widetilde{\lambda}_i, \widetilde{\varphi}_i)(\|\widetilde{\varphi}_i\| = 1), i = 1, 2, \cdots, m$ 作为 A 的某些特征对 $(\lambda_i, \varphi_i), i = 1, 2, \cdots, m$ 的近似值。子空间 K 称为右子空间，L 称为左子空间。当选取 $K = K_m(A, v_1), L = K_m(A^*, w_1)$, 且 $V_m = (v_1, v_2, \cdots, v_m)$ 和 $W_m = (w_1, w_2, \cdots, w_m)$, 其中 $v_1, v_2, \cdots, v_m$ 和 $w_1, w_2, \cdots, w_m$ 分别作为 K 和 L 的一组双正交基 $(W_m^* V_m = I_m)$ 时，斜投影方法即为双正交 Lanczos 方法 [16] 。双正交 Lanczos 过程产生 $V_m = (v_1, v_2, \cdots, v_m)$ 和 $W_m = (w_1, w_2, \cdots, w_m)$ ，它们是 $K_m(A, v_1)$ 和 $K_m(A^*, w_1)$ 的基 [22], 并且满足：

$$\rho_{k+1} v_{k+1} = r_{k+1} = A v_k - \alpha_k v_k - \gamma_k v_{k-1}, \tag{2.1}$$

$$\xi_{k+1}^* w_{k+1} = s_{k+1} = A^* w_k - \alpha_k^* w_k - \frac{\rho_k^* \delta_k}{\delta_{k-1}} w_{k-1}, \tag{2.2}$$

其中 $\gamma_k = \frac{\xi_k \delta_k}{\delta_{k-1}}$,$\delta_k = w_k^* v_k$,$\alpha_k = \frac{w_k^* A v_k}{\delta_k}$, ρ_k 和 ξ_k 为规范化常数。初始向量 v_1, w_1 可随机选取，并且 $\gamma_1 = \rho_1 = 0$, 上式的矩阵形式如下：

$$A V_m = V_m T_m + \rho_{m+1} v_{m+1} e_m^*, \tag{2.3}$$

$$A^* W_m = W_m \Delta_m^{-1} T_m^* \Delta_m + \xi_{m+1}^* w_{m+1} e_m^*, \tag{2.4}$$

其中 $\Delta_m = diag(\delta_1, \delta_2, \cdots, \delta_m), \alpha_k, \rho_k$ 和 γ_k 是三对角矩阵 $T_m = \Delta_m^{-1} W_m^* A V_m$ 的元素，即

$$T_m = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \gamma_2 & & & \\ \rho_2 & \alpha_2 & \gamma_3 & & \\ & \rho_3 & \alpha_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \gamma_m \\ & & & \rho_m & \alpha_m \end{pmatrix}. \tag{2.5}$$

注意到 $W_m^* V_m = I_m$, 则 $\delta_k = w_k^* v_k = 1$, 故 $\Delta_m = I, \alpha_k = w_k^* A v_k$, 进而可以将双正

交 Lanczos 过程的矩阵形式表示为

$$AV_m = V_m T_m + \rho_{m+1} v_{m+1} e_m^* = V_{m+1} \begin{pmatrix} T_m \\ \rho_{m+1} e_m^* \end{pmatrix}, \tag{2.6}$$

$$A^* W_m = W_m T_m^* + \gamma_{m+1}^* w_{m+1} e_m^* = W_{m+1} \begin{pmatrix} T_m^* \\ \gamma_{m+1}^* e_m^* \end{pmatrix}, \tag{2.7}$$

$$W_m^* A V_m = T_m. \tag{2.8}$$

算法 1 双正交 Lanczos 过程 [22]

1. 开始：选取两个单位长度向量 v_1, w_1, 满足 $w_1^* v_1 = 1$, 置 $\gamma_1 = \rho_1 = 0, w_0 = v_0 = 0$， $r = Av_1$, $s = A^* w_1$.

2. 迭代：

for $k = 1, 2, \cdots, m \;\; do$:

$\alpha_k = w_k^* r$;

$r = r - \alpha_k v_k$;

$s = s - \alpha_k^* w_k$;

$r = r - (r^* w_k) v_k$;

$s = s - (s^* v_k) w_k$;

if($\|r\| = 0$ or $\|s\| = 0$),stop;

$\widetilde{\delta}_k = r^* s$;

if($\tilde{\delta}_k = 0$),stop;

$\rho_{k+1} = |\widetilde{\delta}_k|^{1/2}$;

$\gamma_{k+1} = \widetilde{\delta}_k^* / \rho_{k+1}$;

$v_{k+1} = r / \rho_{k+1}$;

$w_{k+1} = s/\gamma_{k+1}^*$;

$r = Av_{k+1} - \gamma_{k+1} v_k$;

$s = A^* w_{k+1} - \rho_{k+1}^* w_k$.

当 $\widetilde{\delta_k} \approx 0$ 时可能会发生严重中断，但这可以用 Look-ahead 方法处理。

由（ 2.8 ）式可知，若 μ_i 和 q_i 、 z_i 分别为 T_m 的特征值及其相应的左、右特征向量，则可将 μ_i 和 $y_i = \frac{W_m q_i}{\|W_m q_i\|}, x_i = \frac{V_m z_i}{\|V_m z_i\|}$ 分别作为 A 的特征值及其相应的左、右特征向量的近似，分别称为 $Ritz$ 值和左、右 $Ritz$ 向量。

§2.2 双正交 Lanczos 算法

算法 2 双正交 Lanczos 算法

1. 开始：选取子空间的维数 m 及所求特征对个数 $l(l \leq m)$ 、控制精度 tol 和单位长度向量 v_1, w_1;

2. 完成 m 步双正交 Lanczos 过程，形成 V_m, T_m, W_m;

3. 计算近似特征对：计算出 T_m 的所有特征值及其相应的左、右特征向量，按需要将特征值排序，选择其中 l 个 $\mu_i(i = 1, 2, \cdots, l)$ 作为所求特征值的近似，并形成 $y_i, x_i(i = 1, 2, \cdots, l)$ 将它们作为所求左、右特征向量的近似;

4. 检验收敛：分别检验 l 个左、右近似特征对 (μ_i, y_i) 、 $(\mu_i, x_i) i = 1, 2, \cdots, l$ 的残量，若均小于 tol ，则停机，否则继续。

5. 重新开始：用 $y_i, x_i(i = 1, 2, \cdots, l)$ 构成新的初始向量，转 2.

重新启动时新的初始向量 v_1, w_1 的选取方式为 [23] ：

$$\alpha v_1 = \sum_{i=1}^{l} \|(A - \mu_i I) x_i\| (Real(x_i) + Imag(x_i)), \tag{2.9}$$

$$\gamma w_1 = \sum_{i=1}^{l} \|y_i^*(A - \overline{\mu}_i I)\| (Real(y_i) + Imag(y_i)), \tag{2.10}$$

其中 α, γ 为规范化因子。陈在 [23] 中指出这种方法对求解复特征值的实部相对较小的问题更为有效。

第三章 精化双正交 Lanczos 方法

§3.1 精化双正交 Lanczos 方法

针对一般子空间 E 上的精化投影方法，贾和 Stewart[11, 13, 14, 15] 在 A 为亏损阵的最一般条件下建立了精化向量 $\widetilde{u}_i$ 的先验估计式，分析了精化向量的收敛性，并由此说明了精化向量 $\widetilde{u}_i$ 收敛到对应的特征向量 φ_i 的充分条件与近似特征值 $\widetilde{\lambda}_i$ 收敛到对应的特征值 λ_i 的充分条件是相同的。因此，精化投影方法避免了正交投影方法的 $Ritz$ 向量可能不收敛的缺陷，从理论上可以保证在近似特征值收敛情况下，相应的特征向量也必然收敛，这大大增强了精化投影方法的可靠性。下面就利用精化投影方法对经典的双正交 Lanczos 方法进行改进，利用精化思想求出矩阵 A 的左、右特征向量的近似值。

（ 2.5 ）式中的 T_m 是一个非对称三对角矩阵，为了求 A 的近似特征值更为容易些，构造对称三对角矩阵

$$\widehat{T}_m = \Omega^{-\frac{1}{2}} T_m \Omega^{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & (\rho_2\gamma_2)^{\frac{1}{2}} & & & \\ (\rho_2\gamma_2)^{\frac{1}{2}} & \alpha_2 & (\rho_3\gamma_3)^{\frac{1}{2}} & & \\ & (\rho_3\gamma_3)^{\frac{1}{2}} & \alpha_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & (\rho_m\gamma_m)^{\frac{1}{2}} \\ & & & (\rho_m\gamma_m)^{\frac{1}{2}} & \alpha_m \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

其中 $\Omega = diag(1, \frac{\rho_2 w_1}{\gamma_2}, \frac{\rho_3 w_2}{\gamma_3}, \cdots, \frac{\rho_m w_{m-1}}{\gamma_m})$，且 w_j 是 Ω 的第 j 个对角元素。此时 T_m 与 $\widehat{T}_m$ 具有相同的特征值，而 $\widehat{T}_m$ 与 T_m 是同阶的小规模矩阵问题，但相对于 T_m ，$\widehat{T}_m$ 的特征值问题求解更稳定。

设 $\widetilde{\lambda}_i$ 为 $\widehat{T}_m$ 的特征值，用它作为 A 的特征值的近似。根据精化投影方法的思想，对已给定的特征值的近似 $\widetilde{\lambda}_i$，下面介绍左、右精化向量的求法。考虑

$$\min_{x\in K_m(A,v_1),\|x\|=1} \|(\widetilde{\lambda}_i I - A)x\| = \min_{\forall u\in R^m,\|u\|=1} \|(\widetilde{\lambda}_i I - A)V_m u\|$$

$$= \min_{\forall u \in R^m, \|u\|=1} \|\widetilde{\lambda}_i V_m u - V_{m+1} \begin{pmatrix} T_m \\ \rho_{m+1} e_m^* \end{pmatrix} u\|$$

$$= \min_{\forall u \in R^m, \|u\|=1} \|V_{m+1} \begin{pmatrix} \widetilde{\lambda}_i I_m - T_m \\ -\rho_{m+1} e_m^* \end{pmatrix} u\|. \tag{3.2}$$

因为 V_{m+1} 不为正交阵，此处则求满足

$$\| \begin{pmatrix} \widetilde{\lambda}_i I_m - T_m \\ -\rho_{m+1} e_m^* \end{pmatrix} \widetilde{u}_i \| = \min_{\forall u \in R^m, \|u\|=1} \| \begin{pmatrix} \widetilde{\lambda}_i I_m - T_m \\ -\rho_{m+1} e_m^* \end{pmatrix} u\|$$

$$= \sigma_{min} \begin{pmatrix} \widetilde{\lambda}_i I_m - T_m \\ -\rho_{m+1} e_m^* \end{pmatrix} \tag{3.3}$$

的 $\widetilde{u}_i$, 令

$$\widetilde{x}_i = \frac{V_m \widetilde{u}_i}{\|V_m \widetilde{u}_i\|}, \tag{3.4}$$

显然 $\widetilde{u}_i$ 为矩阵 $\begin{pmatrix} \widetilde{\lambda}_i I_m - T_m \\ -\rho_{m+1} e_m^* \end{pmatrix}$ 的最小奇异值相对应的右奇异向量，称上述 $\widetilde{x}_i$ 为矩阵 A 的右精化向量。类似地

$$\min_{y \in K_m(A^*, w_1), \|y\|=1} \|(\overline{\widetilde{\lambda}}_i I - A^*) y\| = \min_{\forall z \in R^m, \|z\|=1} \|(\overline{\widetilde{\lambda}}_i I - A^*) W_m z\|$$

$$= \min_{\forall z \in R^m, \|z\|=1} \|\overline{\widetilde{\lambda}}_i W_m z - W_{m+1} \begin{pmatrix} T_m^* \\ \gamma_{m+1}^* e_m^* \end{pmatrix} z\|$$